Title	調和一次元格子の熱浴としての性質
Author(s)	宗像, 豊哲
Citation	物性研究 (1971), 17(3): 219-227
Issue Date	1971-12-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/88387
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

調和一次元格子の熱浴としての性質

京都大学　工　学　部
数理工学科
応用力学研究室　宗　像　豊　哲

（１１月１９日受理）

§1　序　　論

一次元不完全格子の熱伝導は最近多くの人の興味をあつめている。この内，Payton 等[1]や中沢[2]は温度差のある二つの熱浴が注目する格子Sの両端に取り付けられているとし，この熱浴の格子Sに与える効果について priori な確率的性質を導入している。中沢[2]は熱浴の効果をSの両端の粒子に作用する frictional force $-\beta v$ と white noise random force として表わしている。dynamical な熱浴（Hamiltonianを持つ熱浴）を考え，これの注目する系へ及ぼす効果を explicit に抽出し，上に述べたとり扱いに対して一つの理論的基礎づけを与えているのに，Lebowitz[3]の仕事がある。彼は熱浴として無限ケの粒子からなる理想気体を考え，彼のいわゆるGeneralized Liouville方程式が $Q(=M/m)\gg 1$ の時，Fokker − Planck 型方程式に reduce する事を示した。ここにmは熱浴の粒子の質量，Mは熱浴と直接の相互作用（衝突）する粒子の質量である。さて我々は熱浴が半無限完全調和格子からなる場合を考える。熱浴の効果を抽出するのにGeneralized Liou. eq.は不適当である（常に熱浴と注目する系は相互作用しているので stochastic kernel[3]の計算が困難である）ので，森[4]によるGenerlized Langevin方程式を用いる。適当な初期分布（ initial ensemble ）の導入の下に，半無限調和格子が Lebowitz と同じ条件の下で中沢の熱浴[2]になる事を示す。

§2 Generalized Langevin 方程式

次図のような格子モデルを考える。

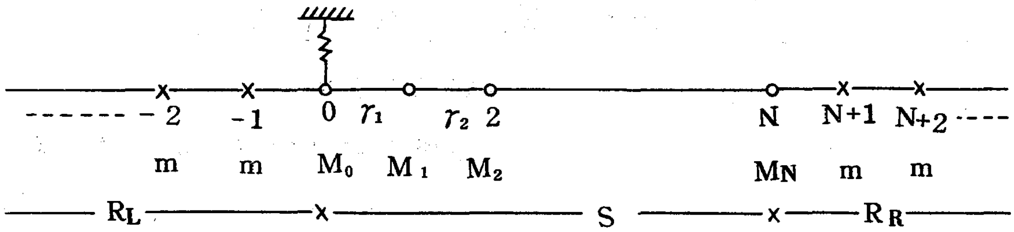

図 1

R_L, R_R は注目する disordered chain S にとりつけられた２つの熱浴であり，各粒子の質量 m，バネ定数 γ とする。全系の Hamiltonian

$$H=\left(\sum_{i=-1}^{-\infty}+\sum_{i=N+1}^{\infty}\right)\left(\frac{p_i^2}{2m}\right)+\frac{\gamma}{2}\left(\sum_{i=0}^{-\infty}+\sum_{i=N+1}^{\infty}\right)(x_i-x_{i-1})^2$$

$$+\sum_{i\in s}\frac{p_i^{\,2}}{2M_i}+\frac{\gamma_i}{2}(x_i-x_{i-1})^2+\frac{\gamma'}{2}x_0^{\,2}\equiv H_L+H_R+H_s \qquad (2.1)$$

p_i, x_i は i 粒子の運動量と変位である。$\eta_i=x_i-x_{i-1}$ とし，注目する物理量Aとして次の 2(N+1) 次元の vector をとる。

$$A^*=(p_0, p_1, \cdots, P_N, x_0, \eta_1, \cdots\cdots \eta_N) \qquad (2.2)$$

G, L, eq.[4)]

$$\frac{d}{dt}A(t)-i\hat{\omega}\cdot A(t)+\int_0^t \varphi(t-s)\cdot A(s)ds=f(t), \qquad (2\cdot3)$$

において $i\hat{\omega}$, $\varphi(t)$, $f(t)$ は次の定義に従う。

$$i\hat{\omega}=(\dot{A}, A)(A, A)^{-1} \qquad (2\cdot4)$$

$$f(t)=e^{it(1-\mathscr{P})\mathscr{L}}[\dot{A}-i\hat{\omega}\cdot A]\equiv e^{it(1-\mathscr{P})\mathscr{L}}f, \qquad (2.5)$$

$$\varphi(t)=(f(t), f)(A, A)^{-1} \qquad (2.6)$$

(B, C) は物理量B，Cの内積であり，次で定義する。($\beta=\frac{1}{kT}$)

$$
(\mathrm{B},\mathrm{C}) = Z^{-1} \int \mathrm{B}\cdot\mathrm{C}^{*}\, e^{-\beta H}\, d\Gamma \tag{2.7}
$$

(2.5) における $\mathscr{P}$, $\mathscr{L}$ は projection 及びLiouville作用素であり，

$$
\mathscr{P}\mathrm{B} = (\mathrm{B},\mathrm{A})(\mathrm{A},\mathrm{A})^{-1}\mathrm{A} \tag{2.8}
$$

$$
\frac{d}{dt}\mathrm{B}(t) = i\mathscr{L}\mathrm{B}(t) \tag{2.9}
$$

(2.1)よりカノニカル分布において p_i, η_i, x_0は各々独立なガウス分布と考えうるから(2.7)より次の式のなりたつ事がわかる。

$$
\left.\begin{aligned}
(p_i, p_j) &= M_i k T \delta_{ij} \\
(p_i, x_j) &= (p_i, \eta_j) = 0 \\
(\eta_i, \eta_j) &= \frac{kT}{\gamma_i}\delta_{ij}
\end{aligned}\right\} \tag{2.10}
$$

以下(2.10)を用いて順次 $i\hat{\omega}$, f, $\varphi(t)$ を計算していく。簡単な計算より，

$$
i\hat{\omega} = \left(\begin{array}{ccccc|ccccc}
 & & & & & -\gamma' & \gamma_1 & & & \\
 & & 0 & & & & -\gamma_1 & \gamma_2 & & 0 \\
 & & & & & & & -\gamma_2 & \ddots & \\
 & & & & & & & & \ddots & \gamma_N \\
 & & & & & & 0 & & & -\gamma_N \\
\hline
\frac{1}{M_0} & & & & & & & & & \\
-\frac{1}{M_0} & \frac{1}{M_1} & & 0 & & & & 0 & & \\
 & -\frac{1}{M_1} & \ddots & & & & & & & \\
 & & \ddots & \ddots & & & & & & \\
0 & & & -\frac{1}{M_{N-1}} & \frac{1}{M_N} & & & & &
\end{array}\right) \tag{2.11}
$$

$$f^{*}=(\dot{A}-i\hat{\omega}\cdot A)^{*}=(-\gamma\eta_0,0,0\cdots\cdot 0,\gamma\eta_{N+1},0\cdots\cdot 0)\,. \quad (2.12)$$

$f_L=-\gamma\eta_0$, $f_R=\gamma\eta_{N+1}$は熱浴 R_L, R_R からの random force をあらわす。
(2.6)より

$$\varphi(t)=\left(\begin{array}{ccc:c} \dfrac{(f_L(t),f_L)}{M_0kT},0,0,\cdots 0, & & \dfrac{(f_L(t),f_R)}{M_NkT} & \\ 0 & & 0 & \\ \vdots & 0 & \vdots & 0 \\ 0 & & 0 & \\ \dfrac{(f_R(t),f_R)}{M_0kT},0,0,\cdots 0, & & \dfrac{(f_R(t),f_R)}{M_NkT} & \\ \hdashline & 0 & & 0 \end{array}\right) \quad (2.13)$$

次に $\varphi(t)$ の elementである random forceの相関関数を考える。

$$f_R(t)=e^{it(1-\mathscr{P})\mathscr{L}}f_R=\sum_{n=0}\frac{t^n}{n!}\left[i(1-\mathscr{P})\mathscr{L}\right]^n f_R$$

$$\equiv\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}f_R^{(n)}\,, \quad (2.14)$$

と展開出来るから,

$$(f_R(t),f_R)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}(f_R^{(n)},f_R) \quad (2.15)$$

(2.8),(2.10)を用いて順次 $f_R^{(n)}$, $n=1,2,\cdots$を計算していくと $f_R^{(2n)}$, $n=0,1,2,\cdots$ は $\eta_i(i\geq N+1)$ の一次結合であり, $f_R^{(2n+1)}$, $n=0,1,2,\cdots$ は $p_i(i\geq N+1)$ の一次結合である事がわかり, (2.15)はtの偶関数になる。 $f_R^{(2n)}$ の η_{N+1} の係数を $(\frac{\gamma}{m})^n\cdot\gamma a_n$ とすると, (2.10)の第三式より,

$$(f_R(t), f_R) = \sum_{n=0} \frac{t^{2n}}{(2n)!} \cdot \left(\frac{\gamma}{m}\right)^n \cdot \gamma k T \cdot a_n \tag{2.16}$$

簡単な考察より（ 5)，Appendix ）

$$a_n = (-1)^n \cdot \frac{(2n)!}{n!(n+1)!} \tag{2.17}$$

(2.16)，(2.17)より，

$$\frac{(f_R(t), f_R)}{M_N kT} = \frac{\gamma}{M_N} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{m}\right)^n (-1)^n \cdot \frac{t^{2n}}{(n+1)!\,n!}$$

$$= \frac{\omega_n}{Q_N} \frac{J_1(2\omega_n t)}{t} \quad . \tag{2.18}$$

ここに$Q_N = \frac{M_N}{m}$ ，$\omega_n = \sqrt{\gamma/m}$ であり，$J_1(t)$は一次のBessel関数である。同様にして，

$$\frac{(f_L(t), f_L)}{M_0 kT} = \frac{\omega_n}{Q_0} \cdot \frac{J_1(2\omega_n t)}{t} \tag{2.19}$$

但し$Q_0 = \frac{M_0}{m}$ 。(2 . 10) より

$$(f_R(t), f_L) = (f_L(t), f_R) = 0 \tag{2.20}$$

(2 . 11) ，(2 . 13) ，(2 . 18) ，(2 . 19) ，(2 . 20)を (2 . 3)代入して，最終的に次のG . L . eq.を得る。（ $\gamma' \to 0$ とする。 ）

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{d}{dt} p_0(t) = \gamma_1(x_1(t) - x_0(t)) - \int_0^t \frac{\omega_n}{Q_0} p_0(t-\tau) \cdot \frac{J_1(2\omega_n \tau)}{\tau} d\tau \\
&\qquad\qquad + f_L(t) \\
&\frac{d}{dt} p_n(t) = \gamma_{n+1}(x_{n+1}(t) - x_n(t)) - \gamma_n(x_n(t) - x_{n-1}(t)), \\
&\qquad\qquad 0 < n < N \\
&\frac{d}{dt} p_N(t) = -\gamma_N(x_N(t) - x_{N-1}(t)) - \int_0^t \frac{\omega_n}{Q_N} p_N(t-\tau) \cdot \\
&\qquad\qquad \times \frac{J_1(2\omega_n \tau)}{\tau} d\tau + f_R(t)
\end{aligned}\right\}$$

$$\left.\frac{d}{dt}\, x_i(t) = \frac{p_i(t)}{M_i} \quad , \quad 0 \leqq i \leqq N \right\rfloor \qquad (2.21)$$

ここで η_i はすべて($x_i - x_{i-1}$)に書き変えた。(2.21)は運動方程式の書き変わったものであるが，適当なinitial ensembleと条件(以下マルコフ化条件)の下に，中沢[2]の Langevin eq.に reduce する事を以下に示す。

§3. Langevin 方程式

全systemに対して次のinitial ensembleを考え，random force $f_R(t)$, $f_L(t)$ の stochastic な性質を考える。

$$\rho_0 = Z_L^{-1} \cdot Z_R^{-1}\ e^{-\beta_L H_L - \beta_R H_R}\ \delta(A - A_0) \qquad (3.1)$$

β_L, β_R は熱浴 R_L, R_R の温度 T_L, T_R を用いて各々 $\frac{1}{kT_L}$, $\frac{1}{kT_R}$ であり，$Z_L = \int e^{-\beta_L H_L} d\Gamma_L$, $Z_R = \int e^{-\beta_R H_R} d\Gamma_R$ である。すなわち，$t=0$ において R_L と R_R は温度 T_L, T_R で指定されるカノニカル分布をしており，Sにおいては各粒子の変位と運動量が確定している状態から出発する。§2で述べた $f_R(t)$ 及び $f_L(t)$ の性質と，初期分布(3.1)より

$$\left.\begin{aligned}
\langle f_L(t), f_L\rangle &= M_0 k T_L \cdot \frac{\omega_h}{Q_0}\ \frac{J_1(2\omega_n t)}{t} \\
\langle f_R(t), f_R\rangle &= M_N k T_R \cdot \frac{\omega_h}{Q_N} \cdot \frac{J_1(2\omega_h t)}{t} \\
\langle f_R(t), f_L\rangle &= \langle f_L(t) \cdot f_R\rangle = 0
\end{aligned}\right\} \qquad (3.2)$$

ここに

$$\langle B(t), C\rangle = \int B(t) \cdot C \cdot \rho_0\, d\Gamma \qquad (3.3)$$

(3.2)は初期分布 ρ_0 による random force の相関関数である。森[4]による

次の定理

$$(e^{it(1-\mathscr{P})\mathscr{L}} f, f) = (f, e^{-it(1-\mathscr{P})\mathscr{L}} f) \qquad (3.4)$$

に注目すると $f_R(t)$, $f_L(t)$ の定常性，すなわち

$$\langle f_i(t+\tau), f_i(\tau)\rangle = \langle f_i(t), f_i\rangle, i = L, R \qquad (3.5)$$

を得る。次に memory function $\varphi(t)=\frac{\omega_n}{Q}J_1(2\omega_n t)/t$ に注目しよう。$\varphi(t)$ は $Q\to\infty$, $\omega_n\to\infty$, $\omega_n/Q=\text{const}$. の下に delta 関数 $2\frac{\omega_n}{Q}\delta(t)$ に reduce する。故に Q (Q_0 と Q_N) が十分大きい時，ω_n が $\omega_n/Q=\text{const}$ となるような time scale で運動を眺める時（マルコフ化条件），（2.21）の convolution において $p_0(t)$, $p_N(t)$ を積分の外に出す事が出来て，結局次の Langevin 方程式を得る。

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}p_0(t)=\gamma_1(x_1(t)-x_0(t))-\zeta_0 p_0(t)+f_L(t)\\
&\frac{d}{dt}p_n(t)=\gamma_{n+1}(x_{n+1}(t)-x_n(t))\\
&\qquad\qquad -\gamma_n(x_n(t)-x_{n-1}(t)),\quad 0<n<N\\
&\frac{d}{dt}p_N(t)=-\gamma_N(x_N(t)-x_{N-1}(t))-\zeta_N p_N(t)+f_R(t)\\
&\frac{d}{dt}x_i(t)=\frac{p_i(t)}{M_i},\quad 0\leqq i\leqq N\\
&\langle f_i(t), f_j(t')\rangle = 2\zeta_i kT_i\cdot M_i\,\delta(t-t')\,\delta_{ij},\ i,j=L,R
\end{aligned}\right\} \qquad (3.6)$$

ここに $\zeta_0=\frac{\omega_n}{Q_0}$, $\zeta_N=\frac{\omega_n}{Q_N}$, $M_L=M_0$, $M_R=M_N$, 他も同様。（3.6）はまさに熱浴 R_L, R_R の効果が粘性項 $-\zeta_0 p_0$, $-\zeta_N p_N$ と white noise random force $f_L(t)$, $f_R(t)$ として表わせる事を示している。$f_L(t)$, $f_R(t)$ は運動量 p_i と伸び η_i の一次結合であり，（3.1）より明らかに Gaussian process である。かくして initial ensemble ρ_0 とマルコフ化条件の下に我

々の熱浴 R_L, R_R が中沢の熱浴になる事がわかった。

§4 結び

我々はdiordered な調和一次元格子Sの両端に半無限完全調和格子をとりつけ，これを熱浴とみなしてSの時間発展を調べた。マルコフ化条件の下に，森のG，L，eq．は中沢のLangevin eq．になる事がわかった。これをF－P方程式に直すと，Lebowitz[6]等のF－P方程式になる。（但しfree end とfixed end の違いがある。[7]）Lebowitzは§1で述べた $Q \gg 1$ の条件の他に，衝突が瞬間的であるという条件をつけ加えているが，これは我々のマルコフ化条件の一つである。$\omega_n \gg 1$ に対応していると考えられる。（3．6)式より導かれるF－P方程式は注目する systemSの非平衡定常状態への relaxation を支配する方程式である。dynamical な，構造をもつ熱浴の性質すなわち熱浴のHamiltonian及び熱浴とSとの相互作用を指定したさいの熱浴のSに及ぼす効果，あるいはどのような条件の下にこれが"理想的な熱浴"になるかというのは非平衡統計力学における興味ある問題である。森のG．L．方程式はこの問題への一つの approach を与えている。最後に次の3点を注意しておく。①我々はSとして調和格子を考えたが，非線形格子の場合§2のAに非線形力の項をつけ加える事により（2．21）と同様の結果が得れると考えられる。②（2．21）は不完全一次元調和格子の変位や運動量の相関関数の計算に用いる事が出来る。③完全調和一次元格子の熱浴の性質に関しては,Brown運動との関係で中沢[8]が又 energy flowとの関係で柏村[9]がすでに若干の考察を行なっている。

終りに，有益な助言をいただいた上田顕先生，適切な討論をして頂いた武野正三先生，鶴井明氏に感謝致します。

References

1) D.N.Payton, M. Rich & W.M.Visscher; Phys. Rev. 160, 706 (1967)
E.A.Jackson, J.R.Pasta & J.F.Waters; J. Comp. Phys. 2, 207 (1968)

2) H.Nakazawa; Prog. Theor, Phys, Suppl. No.45 (1970), 231

3) J.L.Lebowitz ; Phys. Rev. 114, 1192 (1959)

4) H.Mori ; Prog. Theor. Phys, 33, 423(1965)

5) T.Munakata & A.Tsurui ; Prog. Theor. Phys. 46, 701(1971)

6) Z.Rieder, J.L.Lebowitz & E.Lieb; J. Math. Phys. 8, 1073(1967)

7) H.Nakazawa; Prog. Theor Phys. 39, 236 (1968)

8) H.Nakazawa ; Prog. Theor. Phys. Suppl. No.36 (1966), 172

9) S.Kashiwamura ; Prog. Theor. Phys, Suppl. No.36 (1966), 153